

T i t a n i u mの基礎解析、ODF, I n v e r s e, シュミット因子

2022年12月16日

HelperTex Office

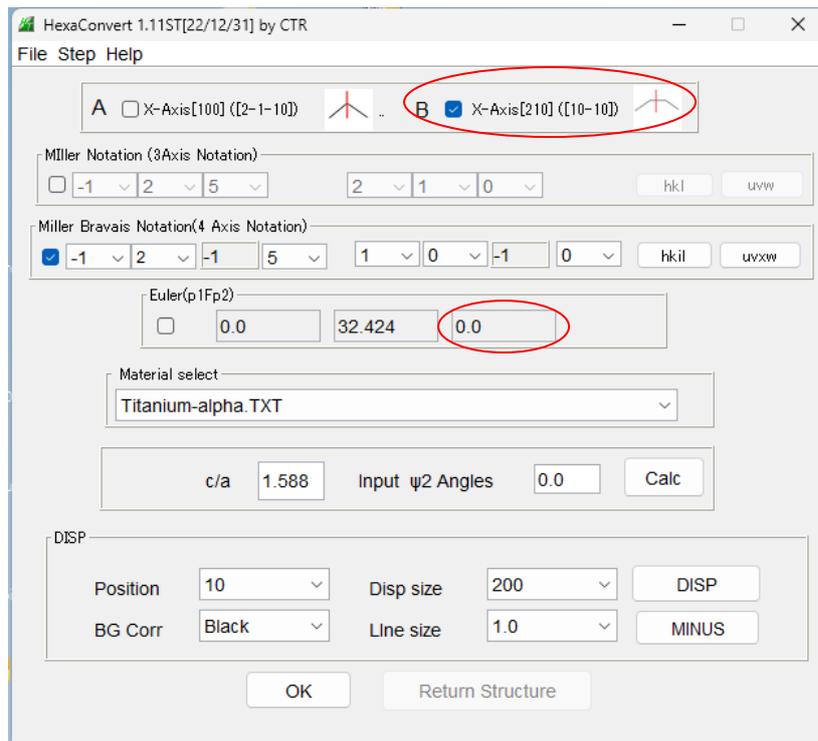
概要

Titaniumを例に、六方晶の解析の手法を説明します。

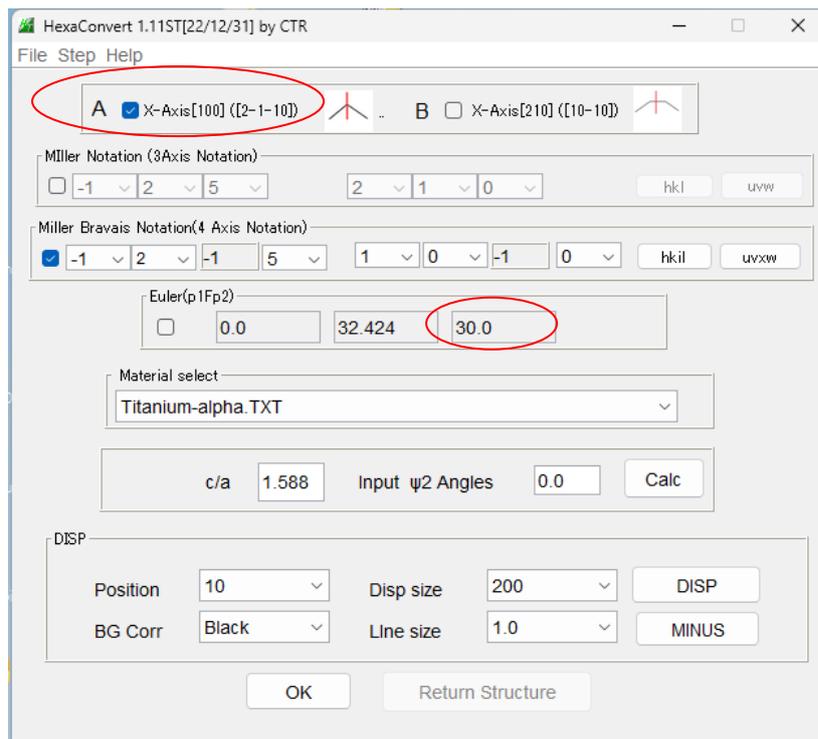
方位は、TD-split (NDからTD方向に32.4度傾き)

100%と50% (残り50%はrandom) を比較します。

X軸を[10-10] 3指数では[210] (-1 2 -1 5) [1 0 -1 0] <> (-1 2 5) [2 1 0]



X軸を[2-1-10] 3指数では[100]

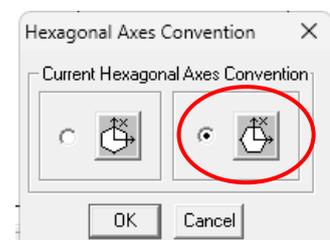


X軸の設定の仕方です ODF図が異なり、φ2が30度シフトします。

解析時、X軸の設定を宣言しましょう。

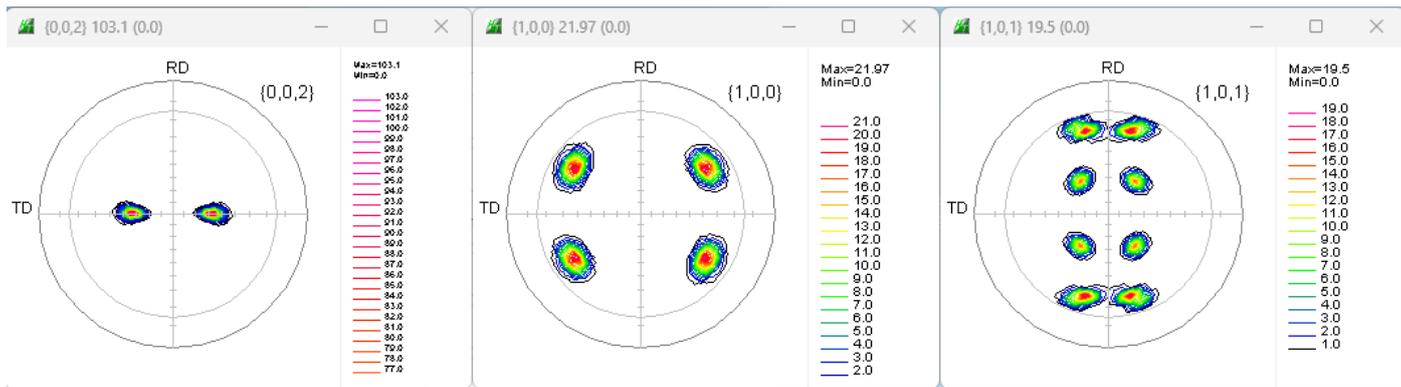
以降、X軸は[10-10] 3指数では[210]で解析を行う。

の評価を行う。

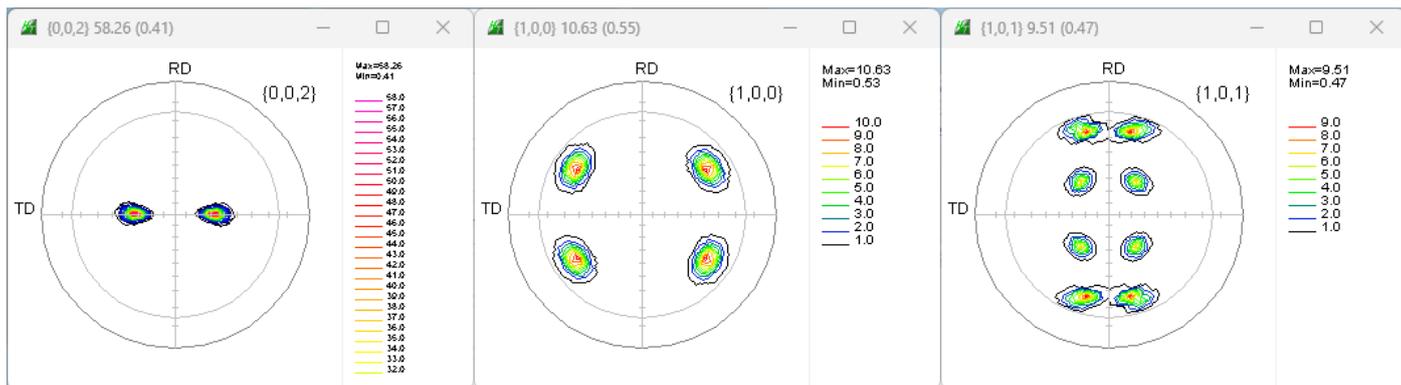


方位100%とrandom50%を含む極点図比較

方位100%



方位50%+random50%



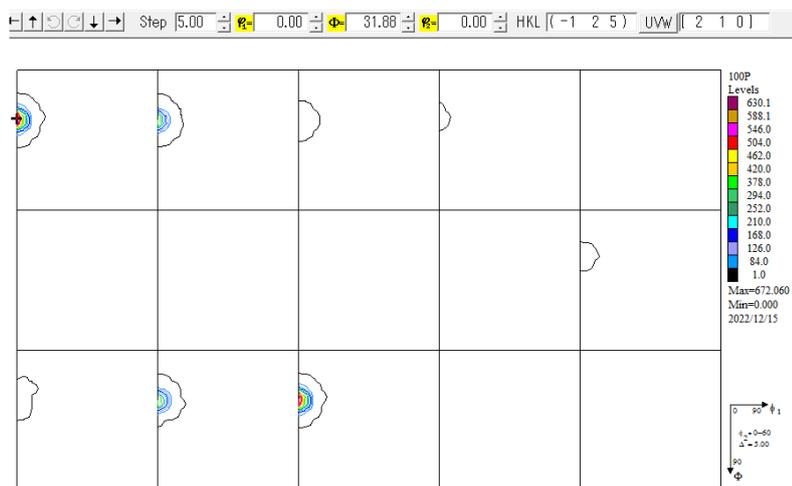
極点図まとめ

| | {100} | | {002} | | {101} | |
|--------|-------|------|--------|------|-------|------|
| | Max | Min | Max | Min | Max | Min |
| 方位100% | 21.97 | 0.00 | 103.10 | 0.00 | 19.50 | 0.00 |
| 方位50% | 10.63 | 0.53 | 58.26 | 0.41 | 9.51 | 0.47 |

randomを含まないと最小密度は0.0

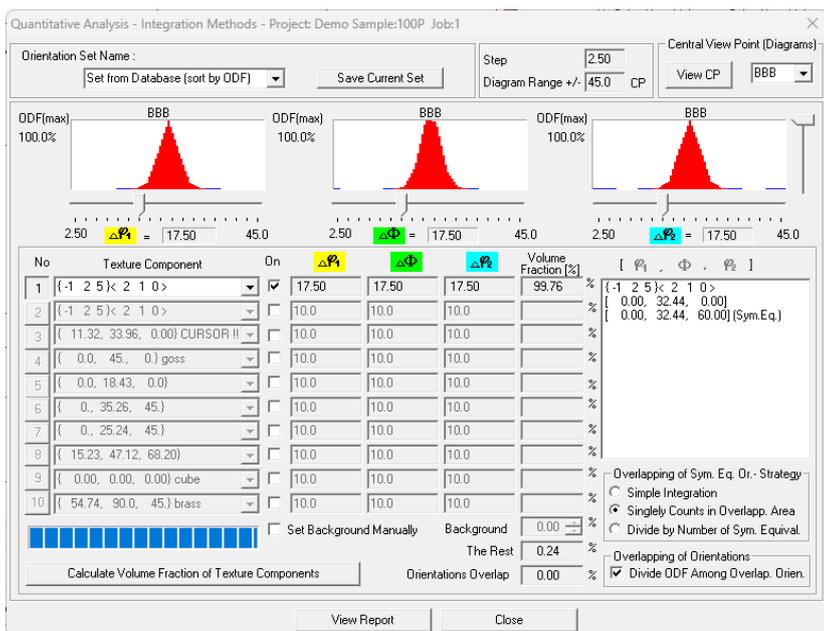
random50%では、不完全極点図最小密度は約0.5を示す。

ODF解析 100% 3指数 (-1 2 5) [2 1 0] の VolumeFraction



Max=672.060
 Min=0.000
 2022/12/15

Integration Methods

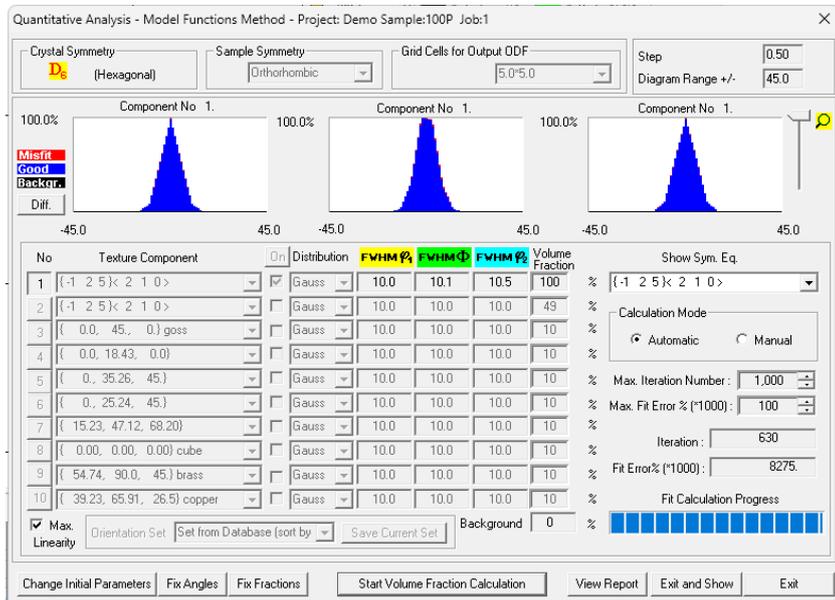


| Volume Fraction | Delta Phi1 | Delta Phi | Delta Phi2 | Orientation |
|-----------------|----------------------------|-----------|------------|--------------------|
| 99.76 | 17.50 | 17.50 | 17.50 | {-1 2 5} < 2 1 0 > |
| 0.00 | Background Volume Fraction | | | |
| 0.24 | The Rest Volume Fraction | | | |

△を手動で青い領域がなくなるまで広げる。

結果
 (-125)[210]が 99.76%
 BGは、0%
 その他が 0.24%

Model Functions Method



| Volume Fraction | FWHM Phi1 | FWHM Phi | FWHM Phi2 | Orientation |
|-----------------|----------------------------|----------|-----------|--------------------|
| 99.99 | 10.0 | 10.1 | 10.5 | {-1 2 5} < 2 1 0 > |
| 0.01 | Background Volume Fraction | | | |

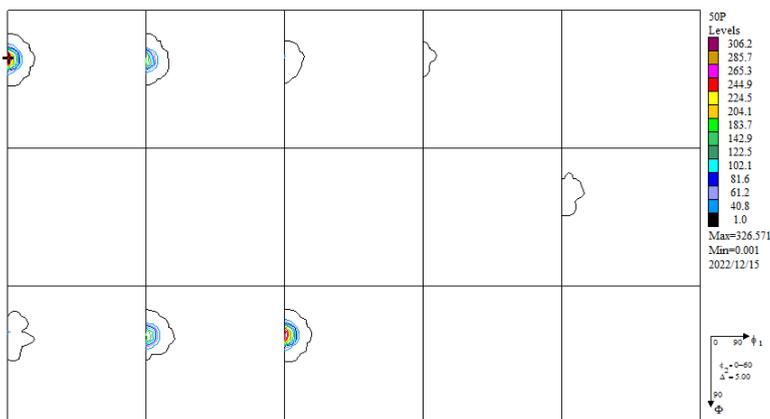
自動で検出された方位を計算

結果
 (-125)[210]が 99.99%
 Random+その他が 0.01%

(-125) [210]の VolumeFraction は 100%が計算される。

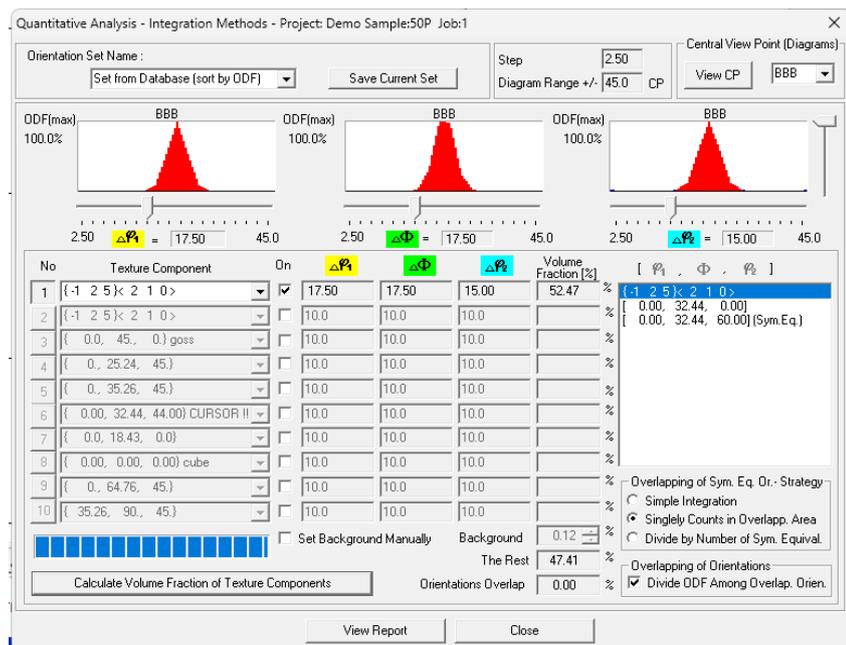
ODF 解析 50%+random(50%) 3 指数 (-1 2 5) [2 1 0] の VolumeFraction

Step 5.00 ϕ_1 0.58 ϕ_2 31.73 ϕ_3 0.00 HKL (-1 2 5) UVW [2 1 0]



Max=326.571
Min=0.001
2022/12/15

Integration Methods

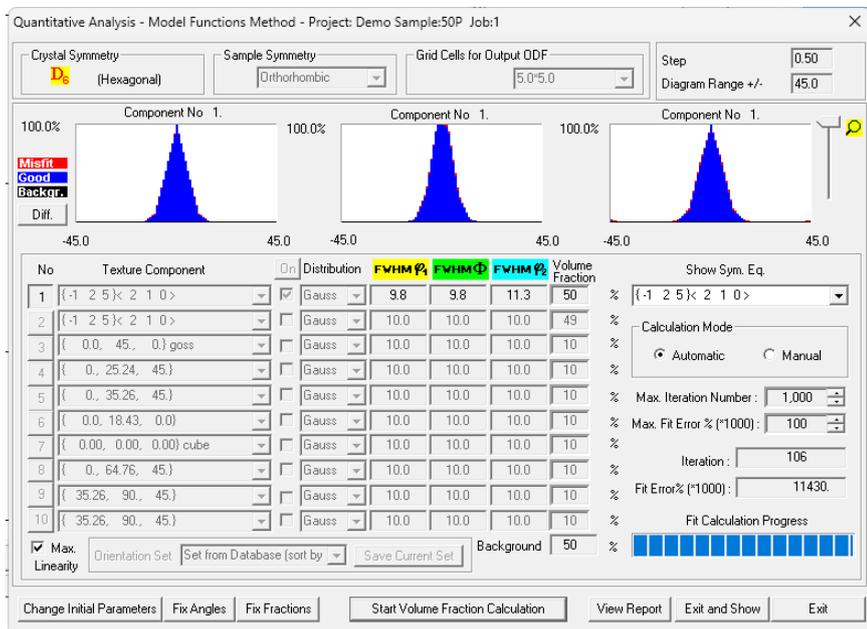


| Volume Fraction | Delta Phi1 | Delta Phi | Delta Phi2 | Orientation |
|-----------------|----------------------------|-----------|------------|--------------------|
| 53.44 | 17.50 | 17.50 | 17.50 | {-1 2 5} < 2 1 0 > |
| 0.12 | Background Volume Fraction | | | |
| 46.44 | The Rest Volume Fraction | | | |

Δ を手動で青い領域がなくなるまで広げる。

結果
(-125)[210]が 52.47%
BG は、0.12%
その他が 46.44%

Model Functions Method



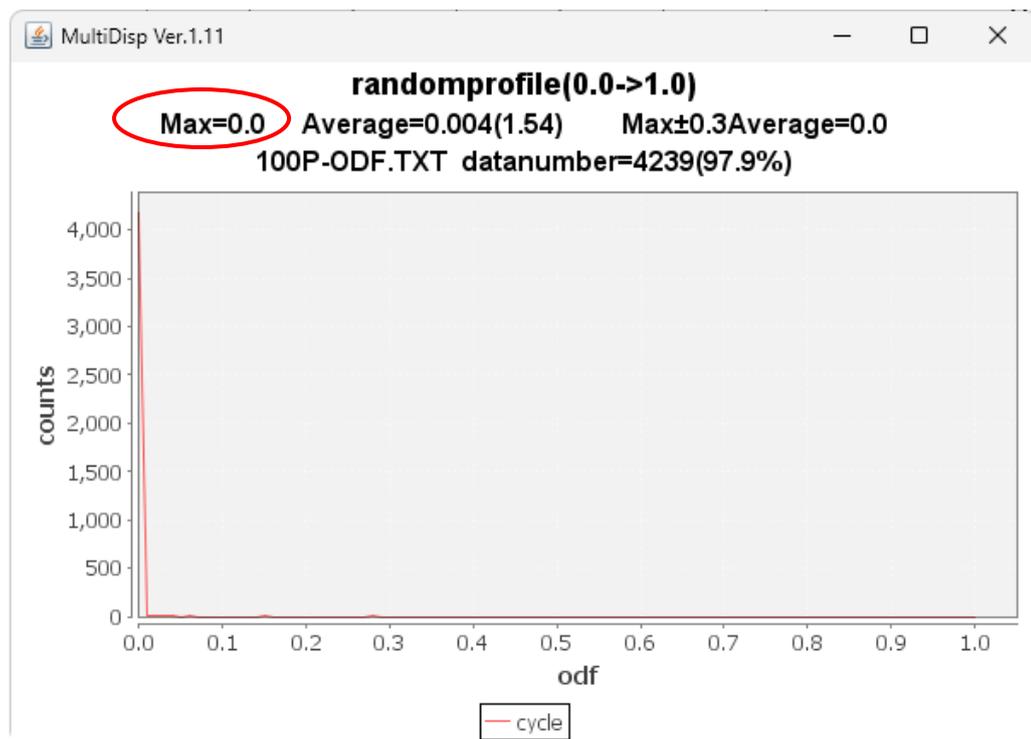
| Volume Fraction | FWHM Phi1 | FWHM Phi | FWHM Phi2 | Orientation |
|-----------------|----------------------------|----------|-----------|--------------------|
| 50.16 | 9.8 | 9.8 | 11.3 | {-1 2 5} < 2 1 0 > |
| 49.84 | Background Volume Fraction | | | |

自動で検出された方位を計算

結果
(-125)[210]が 50.16%
Random+その他が 49.84%

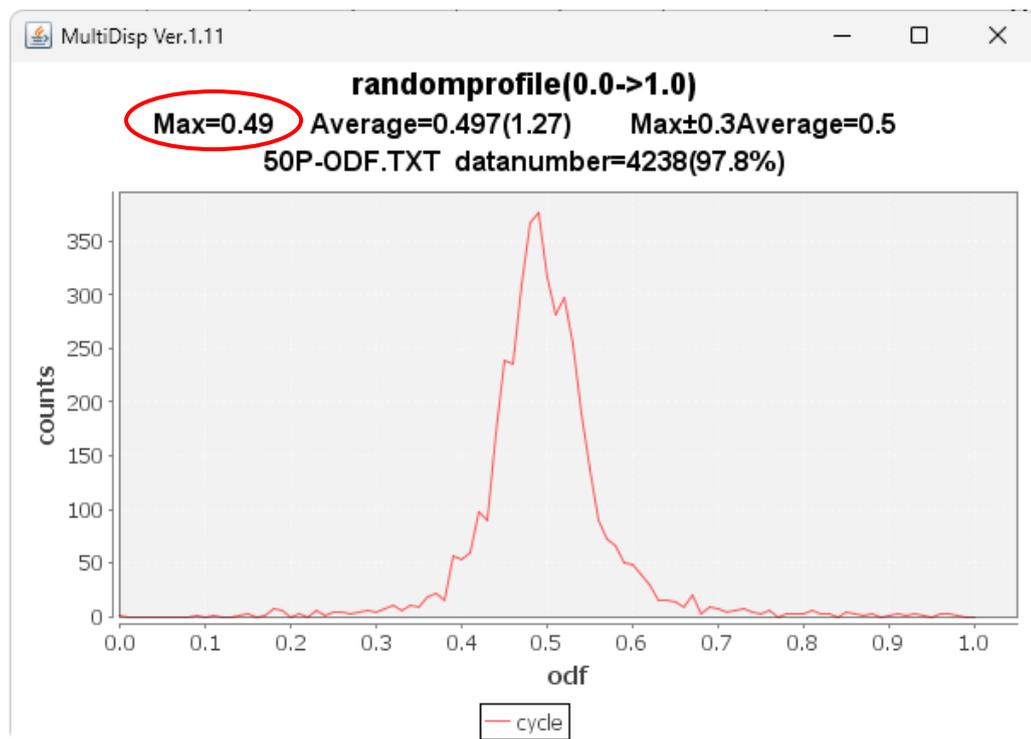
(-1 2 5) [2 1 0] の VolumeFraction は 50.16% が計算される。

100%方位のrandom評価
評価



randomは0.0%

50%+random50%のrandom評価



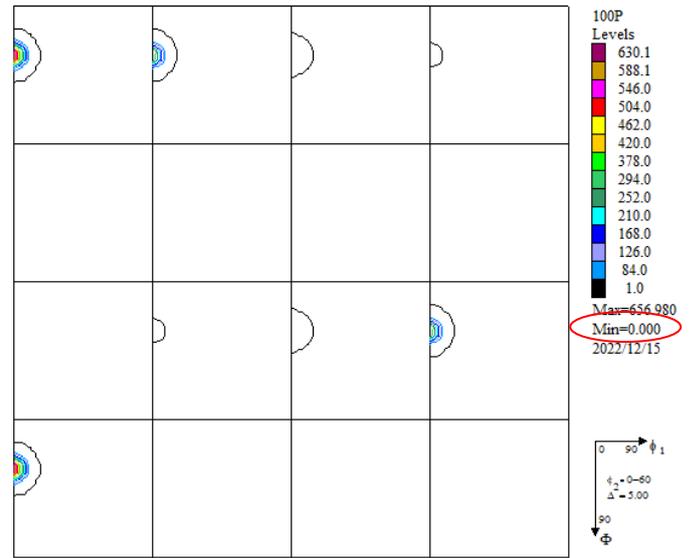
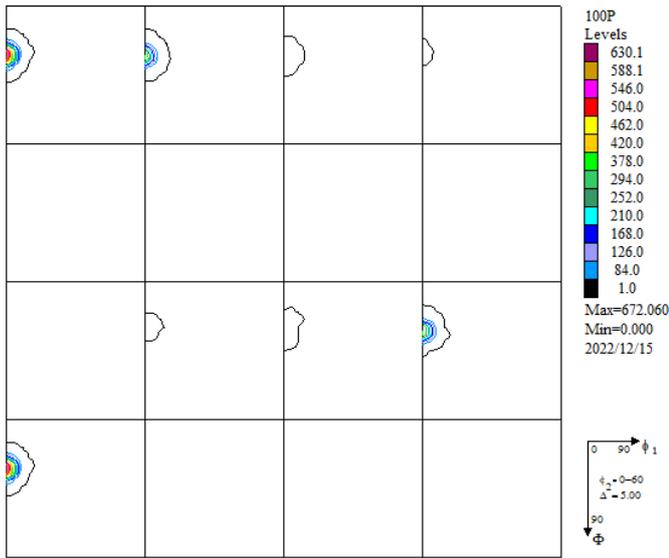
randomが49%含まれています。

{-125}<210.=50.16% random=49% が計算される。

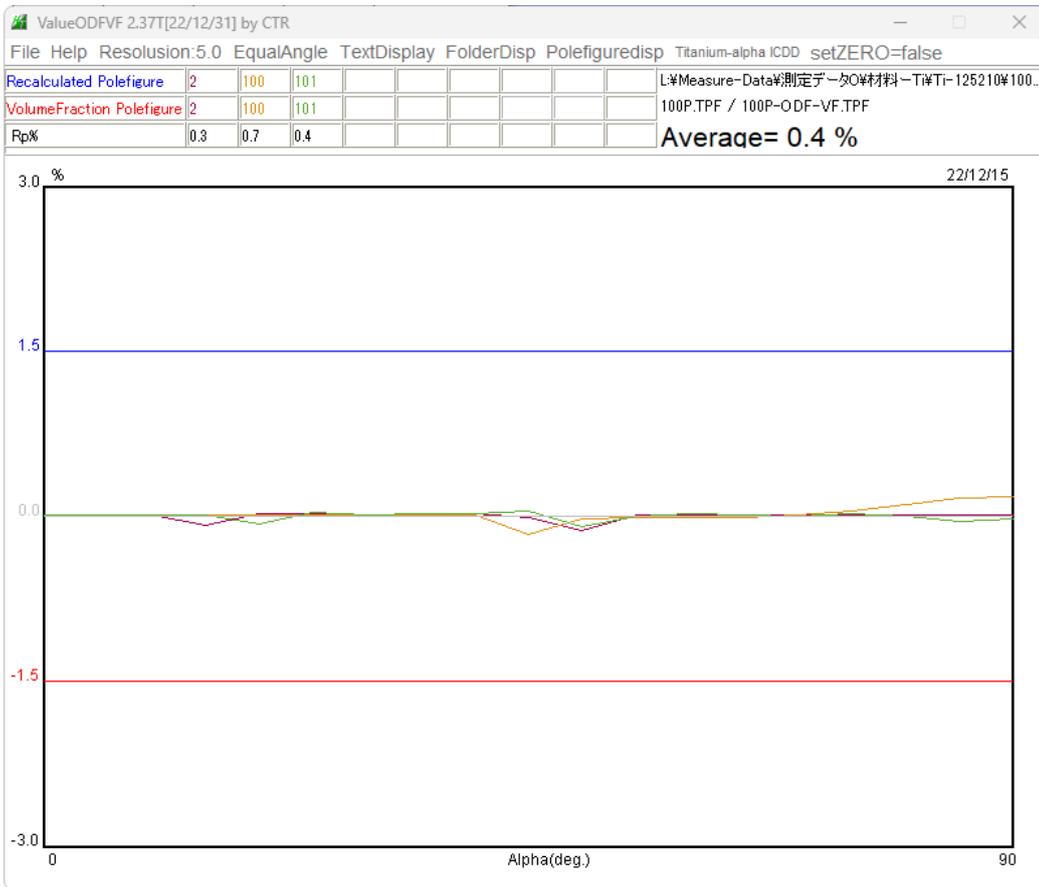
(-1 2 5) [2 1 0] 100%のRp%評価

極点図から ODF 解析

VolumeFraction から計算した ODF 図



極点図から計算した ODF の再計算極点図と VolumeFraction から計算した極点図より Rp%の計算

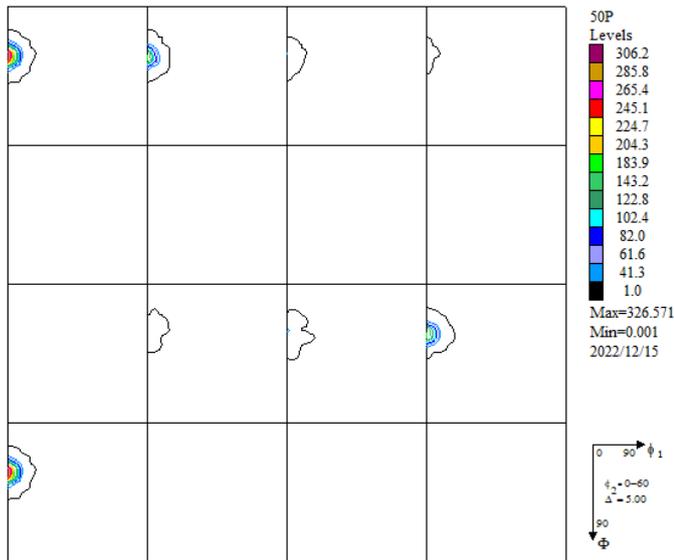


Rp% = 0.4%

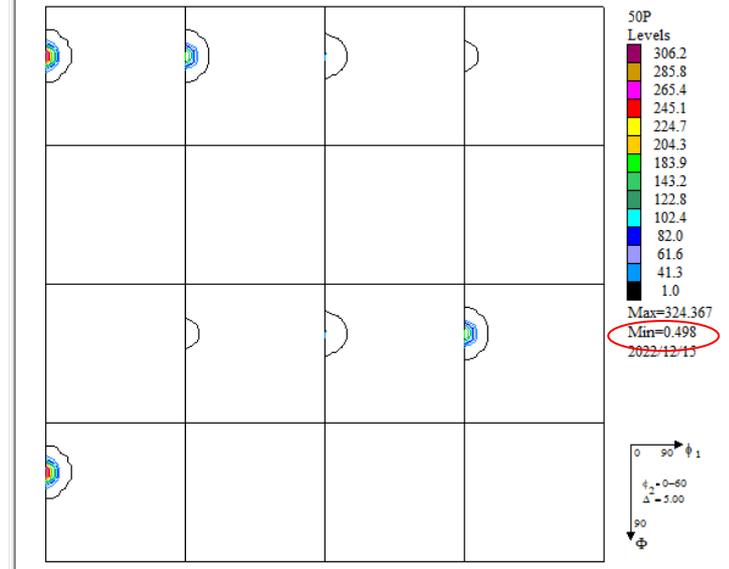
問題なく ODF の VolumeFraction が計算されています。

(-1 2 5) [2 1 0] 50%+random 50%のRp%評価

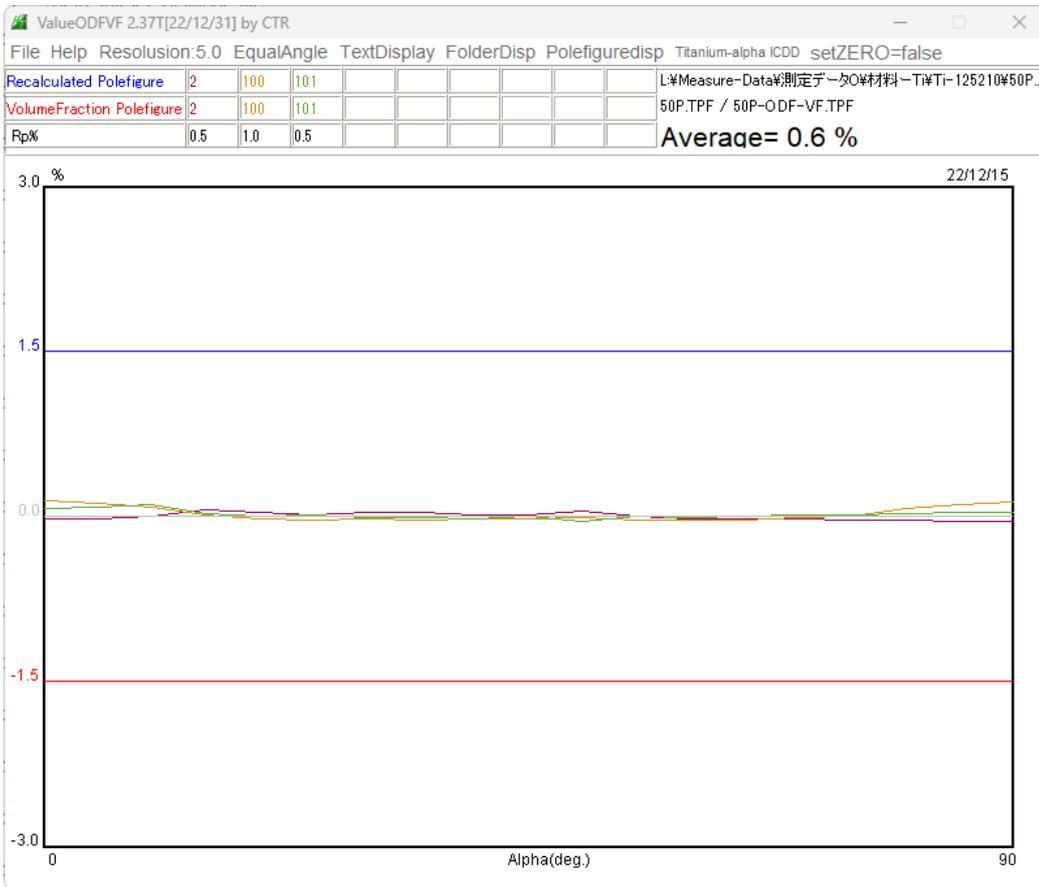
極点図から ODF 解析



VolumeFraction から計算した ODF 図



極点図から計算した ODF の再計算極点図と VolumeFraction から計算した極点図より Rp%の計算



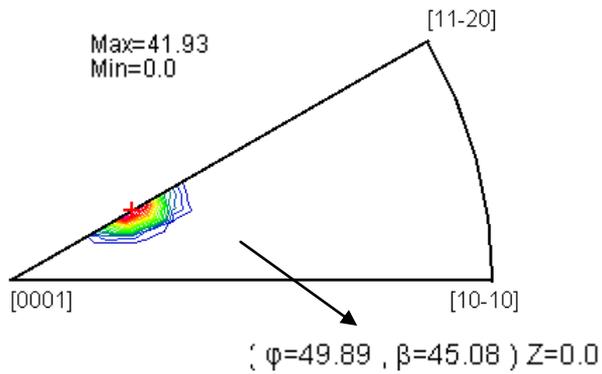
Rp% = 0.6%

問題なく ODF の VolumeFraction が計算されています。

逆極点図

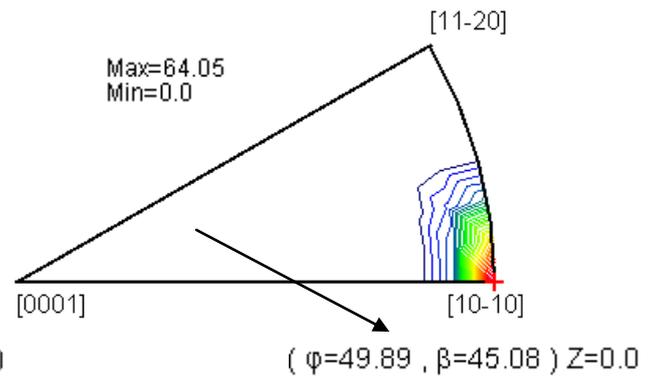
100%

ND



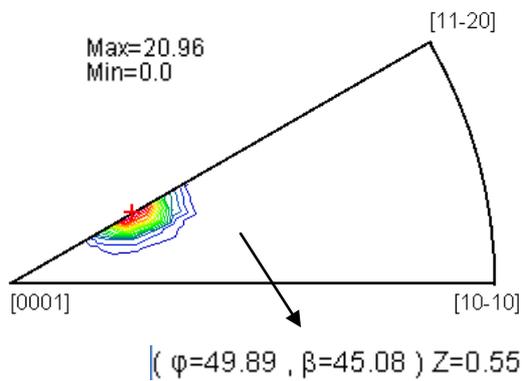
($\phi=32.43, \beta=60.0$) $Z=41.93 \rightarrow (1,1,-2,5)$

RD

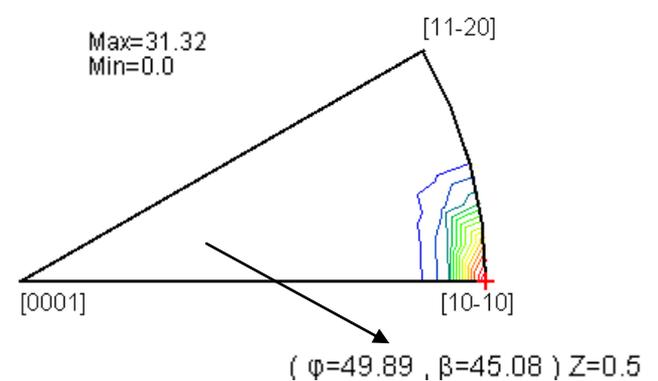


($\phi=90.0, \beta=30.0$) $Z=64.05 \rightarrow [1,0,-1,0]$

50% + random 50%



($\phi=32.43, \beta=60.0$) $Z=20.96 \rightarrow (1,1,-2,5)$



($\phi=90.0, \beta=30.0$) $Z=31.32 \rightarrow [1,0,-1,0]$

等高線分割のmin (最小値) は0.0であるが、マウスカーソルで密度を表示すると random 50%では極以外の密度は0.5近くを示す。

(-1 2 5) [2 1 0] 100%と50%のシュミット因子計算
 100% (すべり面を (0 0 0 1) とした場合)

The screenshot shows the HCPsSchmidFactorCalc3 interface. The 'Slip Systems' section has the $\{0001\}\langle 11-20 \rangle$ system selected. The 'Data input' section shows the slip plane $\{-1\ 2\ -1\ 5\}\langle 1\ 0\ -1\ 0 \rangle$ and a volume fraction of 99.0%. The output table shows the following results:

| {hkil}<uvw> | VF | Schmid | VF*Schmid |
|---|------|--------|-----------|
| $\{-1\ 2\ -1\ 5\}\langle 1\ 0\ -1\ 0 \rangle$ | 99.0 | 0.453 | 0.448 |

Additional output: maxScmidFactor= 0.453, vfsum= 0.99, SchmidFactor(VFsummode)=0.453.

50%+random50% (すべり面を (0 0 0 1) とした場合)

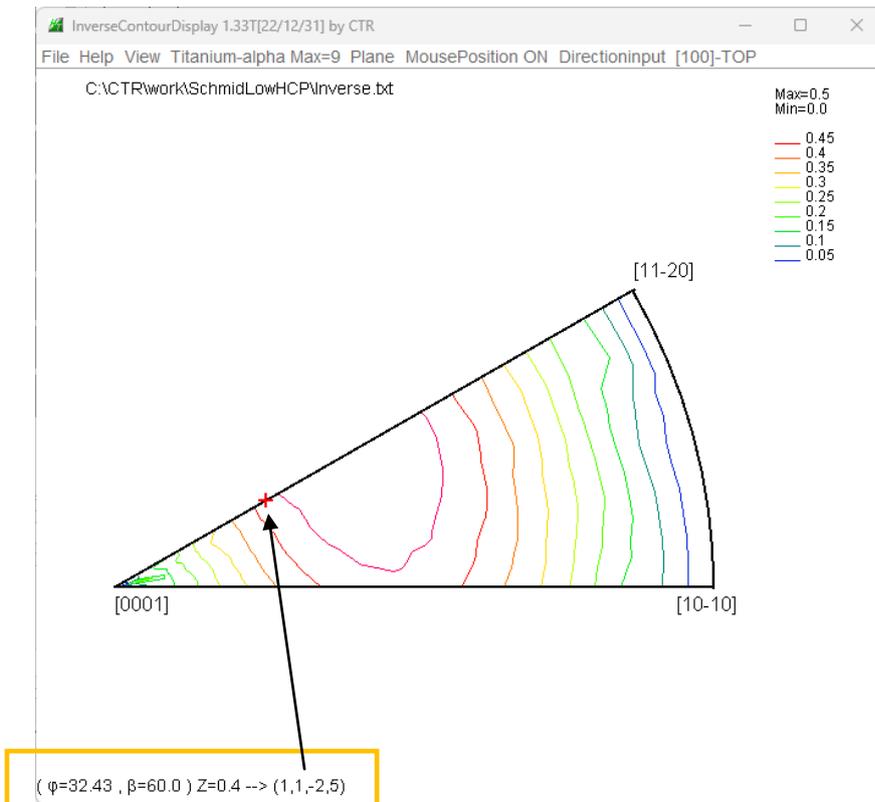
The screenshot shows the HCPsSchmidFactorCalc3 interface. The 'Slip Systems' section has the $\{0001\}\langle 11-20 \rangle$ system selected. The 'Data input' section shows the slip plane $\{-1\ 2\ -1\ 5\}\langle 1\ 0\ -1\ 0 \rangle$ and a volume fraction of 50.0%. The output table shows the following results:

| {hkil}<uvw> | VF | Schmid | VF*Schmid |
|---|------|--------|-----------|
| $\{-1\ 2\ -1\ 5\}\langle 1\ 0\ -1\ 0 \rangle$ | 50.0 | 0.453 | 0.226 |

Additional output: maxScmidFactor= 0.453, vfsum= 0.5, SchmidFactor(VFsummode)=0.453.

Volume Fractionが1/2では、VF * Schmid値も1/2を示す。

{0001} Slipにおける $\{-12-15\}$ の位置



β が 30 \rightarrow 60 の範囲では $\{11-25\}$ で求められる、

Max index 15

Method Plane

Material Titanium-alpha.txt

φ 32.43 β 60 Calc Center[001]

Hexagonal: Input β angle 30->60 X Axis [10-10] B

32.43 60.0 --> (1 1 5) --> (1 1 -2 5)

Plane

h 1 k 1 l 5 Calc

h 1 k 1 t -2 l 5 Calc

Direction

Max index 15 32.43 60.0 --> [7 7 8]
32.43 60.0 --> [7 7 -14 24]

Exit return Structure